

確率モデルのシミュレーションにおける 摂動解析法

三好 直人

本稿で紹介する摂動解析 (Perturbation Analysis; PA) 法は、確率モデルのシミュレーションにおいて感度分析 (勾配推定) を行う手法の1つである。この手法は、どんなモデルにでも適用できるというわけではないが、適用可能なモデルに対しては、分散が小さく、かつ効率よく計算できる推定量を与えてくれる。なお、本稿は文献[1]の一部に少し手を加えたものであることを断わっておく。

1. 背景

確率モデルのシミュレーションにおいて、あるパラメータについての性能評価量の勾配を推定する最も一般的な方法は、次の有限差分 (Finite Difference; FD) 法を用いるものである。話を簡単にするため、パラメータを実数 θ として、モデルのふるまいを支配する確率分布が θ には依存しないものとする。性能評価量をシミュレーションにおける1回の試行によって得られる標本 $\psi(\theta)$ の期待値 $\mathbf{E}\psi(\theta)$ とすると、推定したい勾配は $d\mathbf{E}\psi(\theta)/d\theta$ である。FD法とは、適当な微少量 $\Delta\theta$ を用いて

$$\frac{\psi(\theta + \Delta\theta, \omega_1) - \psi(\theta - \Delta\theta, \omega_2)}{2\Delta\theta}$$

を計算し、これを $d\mathbf{E}\psi(\theta)/d\theta$ の推定値とする方法である。ここで $\omega_i (i=1, 2)$ は1回の試行を表す変数であるが、以下では特に記す必要がない限り省略する。もちろん実際に推定を行う際は、独立な試行を繰り返して上式の値を何度も計算したうえで、統計的な処理をしなければならないし、これは以下で述べる PA 法についても同じである。FD法は簡単で、どんな確率モデルに対しても適用できるが、「 $\Delta\theta$ の値によっては勾配に対する良い推定量を与えない」、「勾配の推定

値を得るための試行の回数がパラメータの数に比例して多くなる」等の問題点が挙げられる。そこで、シミュレーションにおいて $\psi(\theta)$ を1回計算するのと同じ試行から1つの勾配の推定値を得る手法として、PA法が考案されたのである。

2. 摂動解析 (PA) 法

PA法では、(FD法と同様) モデルのふるまいを支配する確率分布がパラメータ θ には依存しないことを仮定する。PA法には様々な発展形があるが、その基本は以下の無限小摂動解析 (Infinitesimal PA; IPA) 法である。IPA法は、単純に1回の試行 ω における標本 $\psi(\theta, \omega)$ の微分係数 $d\psi(\theta, \omega)/d\theta$ を計算し、それを性能評価量の微分係数 $d\mathbf{E}\psi(\theta)/d\theta$ の推定値とするものである。IPA法による推定量が不偏である (推定量の期待値が推定したい量に等しい) ためには、微分と期待値の交換;

$$\mathbf{E} \frac{d\psi(\theta)}{d\theta} = \frac{d\mathbf{E}\psi(\theta)}{d\theta}$$

が成り立たなければならない。このためには標本 $\psi(\theta)$ が θ について連続で区分的に微分可能であることが要求されるが、この条件はモデルや性能評価量をかなり制限してしまう。標本 $\psi(\theta)$ が θ について不連続である場合を扱うための PA 法の発展形の1つが次の平滑化摂動解析 (Smoothed PA; SPA) 法である。

SPA法では、次式のように条件付き期待値を用いることによって、微分と期待値の交換を可能にする:

$$\mathbf{E} \frac{d\mathbf{E}(\psi(\theta)|\mathcal{Z})}{d\theta} = \frac{d\mathbf{E}\psi(\theta)}{d\theta}.$$

ここで \mathcal{Z} は $\psi(\theta)$ の値を計算するのに必要なサンプルパスの情報全体から適当な一部を除いたものであり、上の等式が成り立つように \mathcal{Z} を選ぶことによって $d\mathbf{E}(\psi(\theta)|\mathcal{Z})/d\theta$ が不偏な推定量となる。SPA法は、適当な \mathcal{Z} を見つけることや、 $d\mathbf{E}(\psi(\theta)|\mathcal{Z})/d\theta$ 自体の

みよし なおと

東京工業大学 大学院情報理工学研究科

〒152-8552 目黒区大岡山 2-12-1-W8-52

計算が困難になることもあるが、IPA法に比べて格段に多くのモデルに適用できる。また通常は、標本 $\phi(\theta)$ が θ について不連続であれば、その不連続点は複数あり、不連続点ごとに \mathcal{Z} を選ぶことになるので、不偏な勾配推定量は、不連続点の数だけのSPA法による項と不連続な変化が起こらなかった場合に対応するIPA法による項との和で表されることになる。

3. 適用例

PA法の簡単な適用例として、単純な (s, S) -政策に従う在庫モデルを考える。すなわち、在庫が定期的に観測され、そのときの在庫量が $s(>0)$ 以下であれば、ちょうど $S(>s)$ になるように在庫が直ちに(リード・タイムなしで)補充されるというモデルである。ただし、品切れになった場合も需要は受け付けられるものとして(仮の在庫量が負の値をとる)、不足分は観測時に合わせて補充されるものとする(より一般的なモデルについては文献[2]を参照のこと)。このモデルにおいて、 $n-1$ 番目の観測時点から n 番目の観測時点までの間の需要の量を $D_n(n=1, 2, \dots)$ とすると、在庫量を表す確率過程 $\{X_n; n=0, 1, 2, \dots\}$ は次のように再帰的に表される:

$$X_n = \begin{cases} X_{n-1} - D_n, & X_{n-1} - D_n > s \text{ のとき;} \\ S, & X_{n-1} - D_n \leq s \text{ のとき.} \end{cases} \quad (1)$$

ただし $X_0 = S$ とし、 $\{D_n; n=1, 2, \dots\}$ は独立で同一の分布に従う非負の確率変数の列とする。性能評価量としては、 n 番目の観測時点における費用を $c(X_{n-1} - D_n)$ として、 m 番目の観測時点までの期待総費用:

$$E\phi = E\left(\sum_{n=1}^m c(X_{n-1} - D_n)\right)$$

を考える。ここで関数 $c(x)$ は、 $x=s$ (補充を行うかどうかの境界)に有限のジャンプ(補充にかかる費用)があることを除いて、連続で区分的に微分可能であると仮定する。

(i) まず $S=s+r$ として、 r の値を固定したときの s についての偏微分係数を考える。図1から、任意の Δs とすべての n に対して $X_n(s+\Delta s) = X_n(s) + \Delta s$ であることが分かるので、 $\partial X_n / \partial s = 1$ である。よって $\partial E\phi / \partial s$ に対するIPA法による推定量は

$$\frac{\partial \phi}{\partial s} = \sum_{n=1}^m c'(X_{n-1} - D_n) \quad (2)$$

となる。ここで c' は c の導関数である。 X_n の s に関する連続性と $c(x)$ の($x=s$ 以外での)連続性から、

ϕ も s について連続であり、(2)式は不偏推定量である。

(ii) 次に s の値を固定したときの r についての偏微分係数を考える。 $S=s+r$ よりIPA法による推定量 $\partial \phi / \partial r$ は(2)式の右辺と同じであるが、今度は r の値を $\Delta r(>0)$ だけ変えることによって、それまで補充をしていた時点で補充の必要がなくなる場合があり(図2を参照)、 ϕ は r について連続ではない。詳しい説明は省略するが、 D_n の分布関数を G として、これが密度関数 g を持つものとする、 $\partial E\phi / \partial r$ に対するSPA法による不偏推定量として、

$$\frac{\partial \phi}{\partial r} + \sum_{n \in L(m)} (\phi_n^+ - \phi_n^-) \frac{g(X_{n-1} - s)}{1 - G(X_{n-1} - s)} \quad (3)$$

が得られる。ここで $L(m) = \{n=1, \dots, m | X_{n-1} - D_n \leq s\}$ であり、在庫が補充された観測時点を表す。 ϕ_n^+ と ϕ_n^- はともに、 D_n の代わりに $X_{n-1} - s$ という値を用いる以外は元の $\{D_k; k=1, 2, \dots, m, k \neq n\}$ と同じ列が与えられたときの総費用 ϕ の値を表し、 n 番目の観測時点(ちょうど $X_{n-1} - D_n = s$ である)において、 ϕ_n^+ のほうは補充を行わず $X_n = s$ としたときの値、 ϕ_n^- のほうは補充を行って $X_n = S$ としたときの値である。また $g(X_{n-1} - s) / (1 - G(X_{n-1} - s))$ は、 $D_n \geq X_{n-1} - s$ である(n 番目の観測時点で補充を行った)ことが与えられたときに、 D_n が限りなく $X_{n-1} - s$ に近い値をとる条件付きの率である。すなわち、(3)式の和の中の第 n 項は、補充が行われた時点 n において D_n 以外のすべての情報が与えられた($\mathcal{Z} = \{D_1, \dots, D_{n-1}, D_{n+1}, \dots, D_m\}$)

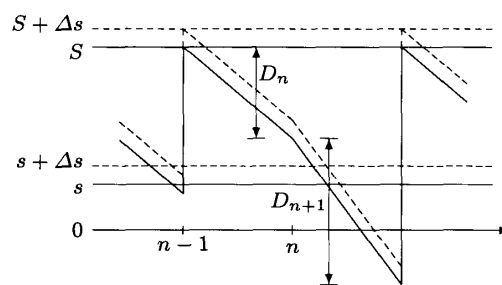


図1 仮在庫量の s の値の変化による影響

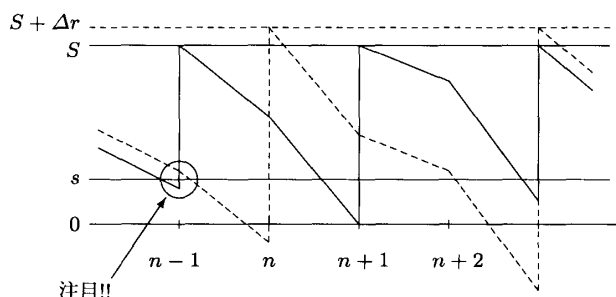


図2 仮在庫量の r の値の変化による影響

..., $D_m\} \cap \{D_n \geq X_{n-1} - s\}$ ときに, D_n が限りなく $X_{n-1} - s$ に近い値をとる率と, その際に補充を行った場合と行わなかった場合の総費用の差との積を表している. 一方, (3)式の第一項は(2)式の右辺に等しく, r の値の変化によって元々は補充を行っていたのが補充しなくなるという在庫量過程の不連続な変化が, m 番目の観測時点までに一度も起こらない場合に対応している.

(iii) 応用例の最後に, D_n の分布がパラメータ θ を持つ場合の θ に関する偏微分係数 $\partial E\psi/\partial\theta$ の不偏推定量を考える. D_n の分布関数とその密度関数を, それぞれ G_θ, g_θ と表す. θ が分布のパラメータなので, 確率分布がパラメータに依存しないという PA 法の仮定を満たさないように見えるが, 通常のシミュレーションでは, 任意の分布に従う確率変数が $[0, 1]$ 上の一様乱数から作られるので, 結局システムのふるまいを支配する確率分布は, 一様分布の結合分布と考えることができる. 例えば $G_\theta^{-1}(u) = \inf\{y \geq 0 : G_\theta(y) \geq u\}$ とすると, $[0, 1]$ 上の一様乱数 U に対して $G_\theta^{-1}(U)$ は分布 G_θ に従う確率変数である. このとき G_θ が θ について微分可能であれば, $G_\theta(D_n(\theta)) = U$ の両辺を微分することによって, D_n の微分係数;

$$\frac{dD_n(\theta)}{d\theta} = -\frac{G'_\theta(D_n(\theta))}{g_\theta(D_n(\theta))}$$

を得ることができる. ここで G'_θ は G_θ の θ に関する微分係数である. さらに θ が D_n のスケール・パラメータであれば, すなわち θ と独立な確率変数 γ が存在して, $D_n(\theta) = \theta \cdot \gamma$ と表せるならば, $dD_n(\theta)/d\theta = D_n(\theta)/\theta$ となり, 微分係数の計算はより簡単である. 観測時点での在庫量 X_n の偏微分係数は, $\tau(n) = \max\{k \leq n : X_{k-1} - D_k \leq s\}$ とおくと, (1)式より

$$\frac{\partial X_n}{\partial \theta} = -\sum_{i=\tau(n)+1}^n \frac{dD_i(\theta)}{d\theta}$$

となる. ただし, $n = \tau(n)$ のときは $\partial X_n/\partial\theta = 0$ である. やはり詳細は省略するが, $D_n(\theta)$ が θ について単調非減少であるとする, $\partial E\psi/\partial\theta$ に対する SPA 法による不偏推定量は以下で与えられる:

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^m c'(X_{n-1} - D_n) \left(\frac{\partial X_{n-1}}{\partial \theta} - \frac{dD_n}{d\theta} \right) \\ & + \sum_{n \in L(m)} (\psi_n^+ - \psi_n^-) \frac{g_\theta(X_{n-1} - s)}{1 - G_\theta(X_{n-1} - s)} \\ & \times \left(\frac{\partial X_{n-1}}{\partial \theta} + \frac{G'_\theta(X_{n-1} - s)}{g_\theta(X_{n-1} - s)} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

少し複雑に見えるかもしれないが, (3)式との違いは, 第一項には $X_{n-1} - D_n$ の偏微分係数がかけられ, 第二

項の和の第 n 項には $D_n = X_{n-1} - s$ における $X_{n-1} - D_n$ の偏微分係数がかけられているという 2 点だけである. これらは, 前の例では $\partial(X_{n-1} - D_n)/\partial r = 1$ であったために陽には現われていなかったものである.

以上の(2)~(4)式で示された推定量は, すべて $\{D_1, \dots, D_m\}$ さえ与えられれば計算することができる. すなわち, シミュレーションにおいて標本 ψ を 1 つ得るのと同じ試行によって, これら偏微分係数の推定値が求められるというわけである. ここで, (3), (4)式に現れる $\psi_n^+ - \psi_n^-$ についての注意点を述べておく. ψ_n^+ と ψ_n^- は, ともに同じ入力列 $\{D_1, \dots, D_{n-1}, X_{n-1} - s, D_{n+1}, \dots, D_m\}$ に対する総費用を表しているが, 一方は n 番目の観測時点において $X_n = s$ とした場合, 他方は $X_n = S$ とした場合に対応する. すなわち $\psi_n^+ - \psi_n^-$ は, 同じ入力列を持つ 2 つの異なるサンプルパスにおける総費用の差であり, これら 2 つのサンプルパスが n 番目の観測時点以降の比較的早い時期に再び一致しないようだと, 推定量の分散が大きくなってしまいかもしれない. この問題は, 確率過程のカップリングと呼ばれる問題として考えることができる.

4. 一貫性について

定常状態での勾配推定を考える際には, 一貫性の問題(観測するサンプルパスの長さを無限にすると, 推定量は定常状態での性能評価量の勾配に収束するか?)が重要である. この問題については省略するが, 興味のある方は例えば文献[3][4]等を参照されたい.

参考文献

- [1] 三好直人: “シミュレーションによる勾配推定の手法,” オペレーションズ・リサーチ, Vol. 46, pp. 182-187 (2001).
- [2] Fu, M. C. and Hu, J.-Q.: *Conditional Monte Carlo : Gradient Estimation and Optimization Applications*, Kluwer (1997).
- [3] Brémaud, P. and Lasgouttes, J.-M.: “Stationary IPA estimates for nonsmooth $G/G/1/\infty$ functionals via Palm inversion and level-crossing analysis,” *Discrete Event Dyn. Syst.*, Vol. 3, pp. 347-374 (1993).
- [4] Miyoshi, N.: “Smoothed perturbation analysis for stationary single-server queues with multiple customer classes,” *Discrete Event Dyn. Syst.*, Vol. 7, pp. 275-293 (1997).